

Formula lui Taylor

Radu Trîmbițaș

23 februarie 2021

1 Formula lui Taylor

- I interval, $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ o funcție derivabilă de n ori în punctul $a \in I$.
Polinomul lui Taylor de gradul n , atașat funcției f în punctul a :

$$(T_n f)(x) = f(a) + \frac{x-a}{1!} f'(a) + \dots + \frac{(x-a)^n}{n!} f^{(n)}(a)$$

- *Restul* de ordinul n al formulei lui Taylor în punctul x

$$(R_n f)(x) = f(x) - (T_n f)(x)$$

- *Formula lui Taylor* de ordinul n pentru funcția f în vecinătatea punctului a :

$$f(x) = (T_n f)(x) + (R_n f)(x)$$

sau

$$f(x) = f(a) + \frac{x-a}{1!} f'(a) + \frac{(x-a)^2}{2!} f''(a) + \dots + \frac{(x-a)^n}{n!} f^{(n)}(a) + (R_n f)(x)$$

2 Restul

- Are loc

$$(R_n f)(x) = \frac{(x-a)^n}{n!} \omega(x), \text{ cu } \lim_{x \rightarrow a} \omega(x) = 0.$$

- Dacă $f \in C^{n+1}(I)$, atunci $\exists \theta \in (0, 1)$ astfel încât

$$(R_n f)(x) = \frac{(x-a)^{n+1} f^{(n+1)}(a + \theta(x-a))}{(n+1)!}$$

(restul în forma Lagrange)

$$(R_n f)(x) = \frac{(x-a)^{n+1} (1-\theta)^n f^{(n+1)}(a + \theta(x-a))}{n!}$$

(restul în forma Cauchy)

$$(R_n f)(x) = \int_a^x \frac{(x-t)^n}{n!} f^{(n+1)}(t) dt$$

(restul în formă integrală)

3 Formula lui Maclaurin

- Dacă în formula lui Taylor se ia $a = 0$, se obține formula lui MacLaurin

$$f(x) = f(0) + x f'(0) + \dots + \frac{x^n}{n!} f^{(n)}(0) + (R_n f)(x),$$

unde

$$(R_n f)(x) = \frac{x^{n+1}}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\theta x), \quad \theta \in (0, 1).$$

- Exemple de dezvoltări uzuale

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \dots + \frac{x^n}{n!} + R_n(x); \quad (1)$$

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \dots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} + R_{2n+1}(x); \quad (2)$$

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \dots + (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!} + R_{2n}(x); \quad (3)$$

- Alte dezvoltări uzuale

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \dots + (-1)^n \frac{x^n}{n+1} + R_{n+1}(x); \quad (4)$$

$$(1+x)^k = 1 + \binom{k}{1}x + \binom{k}{2}x^2 + \dots + \binom{k}{n}x^n + R_n(x), \quad (5)$$

unde

$$\binom{k}{n} = \frac{k(k-1)\dots(k-n+1)}{n!}.$$

4 Aplicații

Problema 1. Să se scrie formula lui MacLaurin pentru funcția $f : [-a, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$, $f(x) = \sqrt{a+x}$, $a > 0$.

Soluție. Scriem $f(x) = \sqrt{a+x} = \sqrt{a} \left(1 + \frac{x}{a}\right)^{\frac{1}{2}}$; se obține

$$f(x) = \sqrt{a} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{x}{a} + (-1)^1 \frac{1}{2^2} \frac{1}{2!} \left(\frac{x}{a}\right)^2 + (-1)^2 \frac{1}{2^3} \frac{1}{3!} \left(\frac{x}{a}\right)^3 + \dots \right. \\ \left. + (-1)^{n-1} \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2n-3)}{n! 2^n} \left(\frac{x}{a}\right)^n + (R_n f)(x) \right].$$

■

Problema 2. Să se determine numărul natural n , astfel ca pentru $a = 0$ și $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $f(x) = e^x$ $T_n f$ să aproximeze f în $[-1, 1]$ cu trei zecimale exacte.

Soluție. Impunem condiția $|(R_n f)(x)| = \left| \frac{x^{n+1} e^{\theta x}}{(n+1)!} \right| < 10^{-3}$. Deoarece $\theta x < 1$, $e^{\theta x} < e < 3$, avem

$$\left| \frac{x^{n+1}}{(n+1)!} e^{\theta x} \right| < \frac{3}{(n+1)!} < 10^{-3} \Rightarrow n = 6.$$

În particular, luând $x = 1$, obținem

$$e - \left(1 + \frac{1}{1!} + \cdots + \frac{1}{6!} \right) < \frac{1}{1000}.$$

■

Problema 3. Să se aproximeze $\sqrt[3]{999}$ cu 12 zecimale exacte.

Soluție. Avem

$$\sqrt[3]{999} = 10 \left(1 - \frac{1}{1000} \right)^{\frac{1}{3}}.$$

Folosim formula (5) pentru $k = 1/3$, $x = -\frac{1}{1000}$. Într-o serie alternată modulul erorii este mai mic decât modulul primului termen neglijat.

$$|(R_n f)(x)| < \left| \binom{\frac{1}{3}}{n} 10^{-3n} \right|.$$

Pentru $n = 4$, avem $|(R_n f)(x)| < \frac{10}{243} 10^{-12} = \frac{1}{24300000000000} = 4.1152 \times 10^{-14}$.

■

5 Probleme propuse

Problema 4. Dezvoltați funcția eroare

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$$

în serie utilizând seria pentru exponențială și integrând. Calculați seria Taylor a lui $\operatorname{erf}(x)$ în jurul lui zero direct. Sunt cele două serii identice? Evaluați $\operatorname{erf}(1)$ adunând patru termeni ai seriei și comparați cu valoarea $\operatorname{erf}(1) \approx 0.8427$, care este dată cu patru zecimale corecte. *Indicație:* Din teorema fundamentală a calculului integral rezultă că

$$\frac{d}{dx} \int_0^x f(t) dt = f(x).$$

Problema 5. Deduceți seria Taylor pentru $\ln(1+x)$ și aproximați $\ln 2$ folosind primii 8 termeni. Câți termeni sunt necesari pentru a obține $\ln 2$ cu 5 zecimale corecte? La fel pentru $\ln \frac{1+x}{1-x}$.

Problema 6. Deduceți seria Taylor pentru arctangentă. Câți termeni sunt necesari pentru a obține $\pi/4$ cu 5 zecimale corecte.

Problema 7 (Aproximare cu serii MacLaurin). O funcția $f \in C^n[a, b]$ se poate aproxima, utilizând seria Maclaurin trunchiată, printr-un polinom de grad n

$$f(x) \approx T_n(x) = \sum_{i=0}^n c_i x^i,$$

unde $c_i = f^{(i)}(0)/i!$.

- (a) Reprezentați grafic și comparați graficele lui $f(x) = e^x$ și ale polinoamelor $(T_2 f)(x)$, $(T_3 f)(x)$, $(T_4 f)(x)$, $(T_5 f)(x)$. Aproximează mulțumitor polinoamele $T_n f$ de grad mare funcția e^x pe un interval din ce în ce mai mare centrat în jurul originii?

- (b) Repetați pentru $g(x) = \ln(1+x)$.

Problema 8 (Aproximare Padé rațională). *Aproximarea Padé rațională* este cea mai bună aproximare a unei funcții printr-o funcție rațională de ordin (m, k) dat. Se definește ca fiind o aproximare rațională de grad (m, k) dat care reproduce valorile funcției și derivatelor ei până la ordinul $m+k$. Ea dă adesea aproximări mai bune decât seriile Taylor trunchiate și uneori lucrează chiar și atunci când seria Taylor nu converge! În loc să utilizăm polinoame de grad mare, putem utiliza câțuri de polinoame de grad mic. Aceste aproximări se numesc *aproximări raționale*. Fie

$$f(x) \approx \frac{p_m(x)}{q_k(x)} = \frac{\sum_{i=0}^m a_i x^i}{\sum_{j=0}^k b_j x^j} = R_{m,k}(x),$$

unde $b_0 = 1$. Aici am normalizat prin $b_0 \neq 0$ iar valorile lui m și k se presupun a fi modeste. Alegem cei k coeficienți b_j și cei $m+1$ coeficienți a_i din $R_{m,k}$ astfel încât $R_{m,k}$ să reproducă valorile lui f și ale unui număr specificat de derivate ale ei în punctul fixat $x = 0$. Construim întâi seria Maclaurin trunchiată $\sum_{i=0}^n c_i x^i$, unde $c_i = f^{(i)}(0)/i!$ și $c_i = 0$ pentru $i < 0$. Apoi, egalăm primele $m+k+1$ derivate ale lui $R_{m,k}$ în raport cu x în $x = 0$ cu primii $m+k+1$ coeficienți c_i . Se obține sistemul:

$$\begin{bmatrix} c_m & c_{m-1} & \cdots & c_{m-(k-2)} & c_{m-(k-1)} \\ c_{m+1} & c_m & \cdots & c_{m-(k-3)} & c_{m-(k-2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ c_{m+(k-2)} & c_{m+(k-3)} & \cdots & c_m & c_{m-1} \\ c_{m+(k-1)} & c_{m+(k-2)} & \cdots & c_{m+1} & c_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{k-1} \\ b_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -c_{m+1} \\ -c_{m+2} \\ \vdots \\ -c_{m+(k-1)} \\ -c_{m+k} \end{bmatrix}.$$

Deoarece $b_0 = 1$, rezolvând acest sistem de dimensiune $k \times k$ vom obține coeficienții b_1, b_2, \dots, b_k . Valorile lui a_0, a_1, \dots, a_m se obțin din

$$a_j = \sum_{\ell=0}^j c_{j-\ell} b_\ell \quad (j = 0, 1, \dots, m).$$

De notat că $a_j = 0$ pentru $j > m$ și $b_j = 0$ pentru $j > k$. De asemenea, dacă $k = 0$, atunci $R_{m,0}$ este seria Maclaurin trunchiată a lui f . Mai mult, aproximarea Padé poate avea singularități.

- (a) Implementați aproximarea Padé pentru f , k , m date.
- (b) Determinați funcțiile raționale $R_{1,1}(x)$ și $R_{2,2}(x)$ pentru $f(x) = e^x$. Reprezentați grafic și comparați graficele lui $f(x) = e^x$, $R_{1,1}$ și $R_{2,2}$. Sunt satisfăcătoare aceste aproximații raționale ale lui e^x pe $[-1, 1]$? Cum se comportă comparativ cu seriile Maclaurin trunchiate din problemele precedente?
- (c) Repetați pentru aproximările $R_{2,2}(x)$ și $R_{3,1}(x)$ ale funcției $g(x) = \ln(1 + x)$.

Problema 9. Calculați dezvoltarea MacLaurin a funcției Bessel $J_0(2x)$. Determinați $R_{2,2}(x)$, $R_{4,3}(x)$ și $R_{2,4}(x)$ și comparați graficele. Funcțiile Bessel J_n se definesc prin

$$J_n(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(x \sin \theta - n\theta) d\theta.$$

Teoria erorilor și aritmetica în virgula flotantă

Radu T. Trîmbițaș

6 martie 2022

1 Probleme

- P1.** Scrieți funcții MATLAB pentru a calcula epsilon-ul mașinii, cel mai mare număr reprezentabil în VF și cel mai mic număr normalizat și nenormalizat reprezentabil în VF. Comparați rezultatele cu cele returnate de funcțiile MATLAB `eps`, `realmin`, `realmax`.
- P2.** Scrieți funcții MATLAB pentru calculul lui $\sin x$ și $\cos x$ folosind formula lui Taylor:

$$\begin{aligned}\sin x &= x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \dots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} + \dots \\ \cos x &= 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \dots + (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!} + \dots\end{aligned}$$

Știm de la cursul de Analiză matematică următoarele:

- modulul erorii este mai mic decât modulul primului termen neglijat;
- raza de convergență este $R = \infty$.

Ce se întâmplă pentru $x = 10\pi$ (și în general pentru $x = 2k\pi$, k mare)?
Explicați fenomenul și propuneți un remediu.

- P3.** Scrieți funcții MATLAB pentru calculul lui $\sin x$ și $\cos x$ folosind aproximarea Padé în locul formulei lui Taylor. Atenție la reducerea rangului.

- P4.** Scrieți o funcție MATLAB care primește la intrare un număr flotant (simplă sau dublă precizie) și returnează reprezentarea sa binară pe componente: semn, exponent deplasat și semnificantul (așa cum este acesta reprezentat intern).

2 Probleme suplimentare

- S1.** Fie două numere reale $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$, $x_1 \neq x_2$. Considerăm reprezentările lor în virgulă flotantă x_1^* și x_2^* astfel încât $x_1^* = \text{fl}(x_1) = x_1(1 + \delta_1)$, $x_2^* = \text{fl}(x_2) = x_2(1 + \delta_2)$ și $|\delta_1| < \delta$, $|\delta_2| < \delta$. Cât de mic trebuie să fie δ , astfel încât să putem testa corect (în virgulă flotantă cu precizia mașinii eps), dacă $x_1 \neq x_2$.
- S2.** Același enunț ca la problema P1, dar în Maple.

Condiționarea unei probleme

Radu T. Trîmbițaș

6 martie 2022

1 Probleme

1. Fie sistemul (exemplul este datorat lui Wilson)

$$\begin{bmatrix} 10 & 7 & 8 & 7 \\ 7 & 5 & 6 & 5 \\ 8 & 6 & 10 & 9 \\ 7 & 5 & 9 & 10 \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} 32 \\ 23 \\ 33 \\ 31 \end{bmatrix}$$

cu soluția $\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}^T$.

- (a) Ce se obține dacă perturbăm membrul drept astfel încât el să devină $\begin{bmatrix} 32.1 & 22.9 & 33.1 & 30.9 \end{bmatrix}$? Care este eroarea relativă la intrare, la ieșire și raportul lor?
- (b) Aceeași întrebare dacă perturbăm matricea sistemului:

$$\begin{bmatrix} 10 & 7 & 8.1 & 7.2 \\ 7.08 & 5.04 & 6 & 5 \\ 8 & 5.98 & 9.89 & 9 \\ 6.99 & 4.99 & 9 & 9.98 \end{bmatrix}.$$

Explicați și analizați fenomenul.

2. Să se studieze condiționarea matricei Hilbert H_n în raport cu norma euclidiană, $n = \overline{10, 15}$.
3. (a) Să se studieze condiționarea matricei Vandermonde $V_n(t)$, pentru $t_k = -1 + k \frac{2}{n}$ (puncte echidistante în $[-1, 1]$) și $n = \overline{10, 15}$ în raport cu norma Cebîșev.

(b) Aceeași întrebare pentru $t_k = \frac{1}{k}$, $k = \overline{1, n}$ și $n = \overline{10, 15}$.

4. Să se studieze teoretic și experimental condiționarea problemei determinării rădăcinilor ecuației polinomiale

$$x^n + a_1x^{n-1} + a_2x^{n-2} + \dots + a_n = 0 \quad (1)$$

cunoscându-se coeficienții. Se va scrie o rutină pentru calculul numărului de condiționare al fiecărei rădăcini și se va studia grafic efectul perturbării fiecărui coeficient cu o variabilă aleatoare normală cu media 0 și dispersia 10^{-10} . Aplicație pentru ecuațiile

$$(x-1)(x-2)\dots(x-n) = 0$$

și (1) pentru $a_k = 2^{-k}$. Se va lua ca exemplu practic pentru testare $n = 20$. Ce se întâmplă dacă perturbația urmează legea uniformă?

5. Fie

$$E_n = \int_0^1 x^n e^{x-1} dx.$$

Se observă că $E_1 = 1/e$ și $E_n = 1 - nE_{n-1}$, $n = 2, 3, \dots$

Se poate arăta că

$$0 < E_n < \frac{1}{n+1}$$

și dacă $E_1 = c$ avem

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E_n = \begin{cases} 0, & \text{pentru } c = 1/e \\ \infty & \text{altfel.} \end{cases}$$

Explicați fenomenul, găsiți un remediu și calculați e cu precizia eps.

2 Probleme facultative

1. Să se studieze condiționarea unei rădăcini multiple a unei ecuații algebrice. Scrieți o rutină MATLAB pentru calculul numerelor de condiționare dacă se dau ecuația (coeficienții), rădăcinile și multiplicitățile lor. Repetați experimentul aleator de la problema 4 pentru ecuația

$$(x - 1)^2(x - 2)^2 \dots (x - n)^2 = 0$$

Sisteme liniare - metode directe

Radu T. Trîmbițaș

14 martie 2021

1 Eliminare gaussiană

Să considerăm sistemul liniar cu n ecuații și n necunoscute

$$Ax = b, \quad (1)$$

unde $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$, $b \in \mathbb{K}^{n \times 1}$ sunt date, iar $x \in \mathbb{K}^{n \times 1}$ trebuie determinat, sau scris pe componente

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 & (E_1) \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 & (E_2) \\ \vdots & \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n & (E_n) \end{cases} \quad (2)$$

1.1 Eliminare gaussiană cu pivotare parțială

Metoda este dată de algoritmul 1.

1.2 Eliminare gaussiană cu pivot scalat pe coloană

O tehnică care micșorează eroarea și preîntâmpină anularea flotantă este *pivotarea parțială cu pivot scalat pe coloană*. Definim la început un factor de scară pentru fiecare linie

$$s_i = \max_{j=1, n} |a_{ij}| \text{ or } s_i = \sum_{j=1}^n |a_{ij}|.$$

Algoritmul 1 Rezolvă sistemul $Ax = b$ prin metoda eliminării a lui Gauss

Intrare: Matricea extinsă $A = (a_{ij})$, $i = \overline{1, n}$, $j = \overline{1, n+1}$

Ieșire: Soluțiile x_1, \dots, x_n sau un mesaj de eroare

```
{Eliminare}
1: for  $i := 1$  to  $n - 1$  do
2:   Fie  $p$  cel mai mic întreg  $i \leq p \leq n$ ,  $a_{pi} \neq 0$  și  $|a_{pi}| = \max_{i \leq j \leq n} |a_{ji}|$ 
3:   if  $\nexists p$  then
4:     mesaj (' $\nexists$  soluție unică'); STOP
5:   end if
6:   if  $p \neq i$  then
7:      $(E_p) \leftrightarrow (E_i)$ 
8:   end if
9:   for  $j := i + 1$  to  $n$  do
10:     $m_{ji} := a_{ji}/a_{ii}$ ;
11:     $(E_j - m_{ji}E_i) \rightarrow (E_j)$ ;
12:  end for
13: end for
14: if  $a_{nn} = 0$  then
15:   mesaj (' $\nexists$  soluție unică'); STOP
16: end if
   {Substituție inversă}
17:  $x_n := a_{n,n+1}/a_{nn}$ ;
18: for  $i := n - 1$  downto  $1$  do
19:    $x_i = \left[ a_{i,n+1} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j \right] / a_{ii}$ ;
20: end for
21: Returnează  $(x_1, \dots, x_n)$  {succes} STOP.
```

Dacă există un i a.î. $s_i = 0$, matricea este singulară. Pașii următori vor stabili interschimbările care se vor face. La al i -lea pas vom găsi cel mai mic întreg p , $i \leq p \leq n$, a.î.

$$\frac{|a_{pi}|}{s_p} = \max_{i \leq j \leq n} \frac{|a_{ji}|}{s_j}$$

și apoi, $(E_i) \leftrightarrow (E_p)$. Scalarea ne garantează că cel mai mare element din fiecare coloană are înainte de comparațiile necesare pentru schimbare mărimea relativă 1. Scalarea se realizează doar în comparații, nu efectiv în matrice, astfel că împărțirea cu factorul de scalare nu produce nici o eroare de rotunjire.

2 Descompunere (factorizare) LUP

Ideea din spatele descompunerii LUP este de a găsi 3 matrice pătratice de ordinul n L, U și P astfel încât

$$PA = LU \tag{3}$$

unde

- L este o matrice triunghiulară inferior;
- U este o matrice triunghiulară superior;
- P este o matrice de permutare.

Tripletul (L, U, P) se va numi **descompunere LUP** a matricei A . Orice matrice nesingulară posedă o astfel de descompunere.

Sistemul

$$Ax = b \tag{4}$$

se poate rezolva astfel

$$Ax = b \iff LUx = Pb \iff Ly = Pb \wedge Ux = y, \tag{5}$$

deoarece

$$Ax = P^{-1}LUx = P^{-1}Ly = P^{-1}Pb = b. \tag{6}$$

Având descompunerea LUP sistemul se poate rezolva cu algoritmul 2.

Algoritmul 2 Rezolvă sistemul $Ax = b$ având descompunerea LUP

Intrare: Matricele L , U , vectorul b , vectorul de permutare π , toate de dimensiune n

Ieșire: Soluțiile x_1, \dots, x_n

```
1: for  $i := 1$  to  $n$  do
2:    $y_i := b_{\pi[i]} - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij}y_j$ ;
3: end for
4: for  $i := n$  downto  $1$  do
5:    $x_i = \left[ y_i - \sum_{j=i+1}^n u_{ij}x_j \right] / u_{ii}$ ;
6: end for
```

Observație. Am presupus că matricea P este reprezentată prin vectorul π .

Procedura care urmează (algoritmul 3) calculează descompunerea LUP. Ea reprezintă P ca un vector π , iar L și U sunt calculate în locul lui A , adică la terminare

$$a_{ij} = \begin{cases} l_{ij}, & \text{pentru } i > j, \\ u_{ij}, & \text{pentru } i \leq j. \end{cases}$$

Algoritmul 3 Descompunere LUP

Intrare: Matricea A , de dimensiune m

Ieșire: Matricele L , U și P , toate de dimensiune m

```
 $p = 1 : m$ ;
for  $k := 1$  to  $m - 1$  do
  {Pivotare}
  Alege  $i \geq k$  care maximizează  $|u_{ik}|$ ;
   $A_{k,:} \leftrightarrow A_{i,:}$ ; {interschimbare}
   $p_k \leftrightarrow p_i$ ;
   $lin := i + 1 : m$ ;
  {Calculez complementul Schur}
   $A_{lin,k} := A_{lin,k} / A_{k,k}$ ;
   $A_{lin,lin} := A_{lin,lin} - A_{lin,k}A_{k,lin}$ ;
end for
Extrage  $L$ ,  $U$ , generează  $P$ ;
```

Exemplu. Să se calculeze descompunerea LUP a matricei

```
A =  
  2.0000  0      2.0000  0.6000  
  3.0000  3.0000  4.0000 -2.0000  
  5.0000  5.0000  4.0000  2.0000  
 -1.0000 -2.0000  3.4000 -1.0000
```

Calcululele decurg astfel

```
>> [l,u,p]=lup(A)
```

interschimb liniile 1 și 3

```
A =  
  
  5.0000  5.0000  4.0000  2.0000  
  3.0000  3.0000  4.0000 -2.0000  
  2.0000  0      2.0000  0.6000  
 -1.0000 -2.0000  3.4000 -1.0000
```

calculez complementul Schur

```
A =  
  5.0000  5.0000  4.0000  2.0000  
  0.6000  3.0000  4.0000 -2.0000  
  0.4000  0      2.0000  0.6000  
 -0.2000 -2.0000  3.4000 -1.0000
```

```
A =  
  5.0000  5.0000  4.0000  2.0000  
  0.6000  0      1.6000 -3.2000  
  0.4000 -2.0000  0.4000 -0.2000  
 -0.2000 -1.0000  4.2000 -0.6000
```

interschimb liniile 2 și 3

A =

5.0000	5.0000	4.0000	2.0000
0.4000	-2.0000	0.4000	-0.2000
0.6000	0	1.6000	-3.2000
-0.2000	-1.0000	4.2000	-0.6000

calculez complementul Schur

A =

5.0000	5.0000	4.0000	2.0000
0.4000	-2.0000	0.4000	-0.2000
0.6000	0	1.6000	-3.2000
-0.2000	0.5000	4.2000	-0.6000

A =

5.0000	5.0000	4.0000	2.0000
0.4000	-2.0000	0.4000	-0.2000
0.6000	0	1.6000	-3.2000
-0.2000	0.5000	4.0000	-0.5000

interschimb liniile 3 și 4

A =

5.0000	5.0000	4.0000	2.0000
0.4000	-2.0000	0.4000	-0.2000
-0.2000	0.5000	4.0000	-0.5000
0.6000	0	1.6000	-3.2000

calculez complementul Schur

A =

5.0000	5.0000	4.0000	2.0000
0.4000	-2.0000	0.4000	-0.2000
-0.2000	0.5000	4.0000	-0.5000
0.6000	0	0.4000	-3.2000

A =

5.0000	5.0000	4.0000	2.0000
--------	--------	--------	--------


```

    0.4000 -2.0000 0.4000 -0.2000
-0.2000  0.5000 4.0000 -0.5000
    0.6000  0      0.4000 -3.0000

```

Rezultatele finale sunt

l =

```

    1.0000  0      0      0
    0.4000  1.0000  0      0
   -0.2000  0.5000  1.0000  0
    0.6000  0      0.4000  1.0000

```

u =

```

    5.0000  5.0000  4.0000  2.0000
    0      -2.0000  0.4000 -0.2000
    0      0      4.0000 -0.5000
    0      0      0      -3.0000

```

p =

```

    0  0  1  0
    1  0  0  0
    0  0  0  1
    0  1  0  0

```

verificare:

>> disp(l*u)

```

    5.0000  5.0000  4.0000  2.0000
    2.0000  0.0000  2.0000  0.6000
   -1.0000 -2.0000  3.4000 -1.0000
    3.0000  3.0000  4.0000 -2.0000

```

>> disp(p*A)

```

    5.0000  5.0000  4.0000  2.0000
    2.0000  0.0000  2.0000  0.6000
   -1.0000 -2.0000  3.4000 -1.0000
    3.0000  3.0000  4.0000 -2.0000

```

3 Descompunere (factorizare) Cholesky

O matrice hermitiană și pozitiv definită se poate factoriza sub forma $A = LL^*$ sau $A = R^*R$, unde L este o matrice triunghiulară inferior, iar R este triunghiulară superior.

Pentru algoritm a se vedea notele de curs sau algoritmul 4.

Algoritmul 4 Descompunere Cholesky

Intrare: Matricea A , hermitiană și pozitiv definită

Ieșire: Matricea R , triunghiulară superior

```
 $R := A;$   
for  $k := 1$  to  $m$  do  
  for  $j := k + 1$  to  $m$  do  
     $R_{j,j:m} := R_{j,j:m} - R_{k,j:m} \overline{R_{k,j}} / R_{k,k}$   
  end for  
   $R_{k,k:m} := R_{k,k:m} / \sqrt{R_{k,k}}$   
end for
```

4 Probleme

Problema 1 Implementați eliminarea gaussiană cu pivotare parțială sau scalată pe coloană (la alegere) în MATLAB.

Problema 2 Să se implementeze descompunerea LUP. Să se scrie rutine pentru rezolvarea unui sistem folosind descompunerea LUP.

Problema 3 Generați sisteme cu matrice aleatoare nesingulare ce au soluția $[1, \dots, 1]^T$. Rezolvați-le cu eliminare gaussiană și descompunere LUP.

Problema 4 Să se scrie rutine pentru descompunerea Cholesky a unei matrice hermitiene și pozitiv definite și rezolvarea unui sistem cu o astfel de matrice prin descompunere Cholesky. Testați rutinele pentru matrice generate aleator și sisteme cu matrice aleatoare, dar cu soluție cunoscută.

Problema 5 *Rezolvați sistemul*

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ -1 & 1 & 0 & \dots & 1 \\ -1 & -1 & 1 & \dots & 1 \\ -1 & -1 & -1 & 1 & \dots & 1 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ -1 & \dots & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \\ \vdots \\ -n+2 \end{bmatrix}$$

prin descompunere LUP și QR. Ce se observă? Explicați.

5 Probleme suplimentare

Problema 6 *Scrieți rutine pentru descompunerea LUP în care permutarea să se facă fizic și logic (cu vectori de permutări) și comparați timpii de execuție al ambelor variante pentru sisteme cu dimensiunea între 100 și 300.*

Sisteme liniare - metode iterative

Radu T. Trîmbițaș

21 martie 2022

1 Metode iterative staționare

Dorim să calculăm soluția sistemului

$$Ax = b, \quad (1)$$

când A este inversabilă. Presupunem că am găsit o matrice T și un vector c astfel încât $I - T$ este inversabilă și punctul fix unic al ecuației

$$x = Tx + c \quad (2)$$

coincide cu soluția sistemului $Ax = b$. Fie x^* soluția lui (1) sau, echivalent, a lui (2).

Iterația: $x^{(0)}$ dat; se definește $(x^{(k)})$ prin

$$x^{(k+1)} = Tx^{(k)} + c, \quad k \in \mathbb{N}. \quad (3)$$

Metoda (3) este convergentă dacă și numai dacă $\rho(T) < 1$, unde $\rho(T)$ este raza spectrală a lui T .

Criteriul de oprire este

$$\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \leq \frac{1 - \|T\|}{\|T\|} \varepsilon. \quad (4)$$

Presupunem că putem descompune A sub forma $A = M - N$. Dacă M este ușor de inversat (diagonală, triunghiulară, ș.a.m.d.) este mai ușor să realizăm calculele în modul următor

$$Ax = b \Leftrightarrow Mx = Nx + b \Leftrightarrow x = M^{-1}Nx + M^{-1}b$$

Ultima ecuație este de forma $x = Tx + c$, unde $T = M^{-1}N = I - M^{-1}A$. Se obține șirul

$$x^{(k+1)} = M^{-1}Nx^{(k)} + M^{-1}b, \quad k \in \mathbb{N}, \quad (5)$$

unde $x^{(0)}$ este un vector arbitrar. Considerăm descompunerea $A = D - L - U$, unde

$$(D)_{ij} = a_{ij}\delta_{ij}, \quad (-L)_{ij} = \begin{cases} a_{ij}, & i > j \\ 0, & \text{altfel} \end{cases}$$

$$(-U)_{ij} = \begin{cases} a_{ij}, & i < j \\ 0, & \text{altfel} \end{cases}$$

Pentru diverse alegeri ale lui M și N se obține:

- metoda lui Jacobi: $M = D$, $N = L + U$. În acest caz, $T = D^{-1}(L + U)$, $c = D^{-1}b$. Scrisă pe componente, metoda are forma

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)} \right)$$

- metoda Gauss-Seidel: $M = D - L$, $N = U$. În acest caz, $T = (D - L)^{-1}U$, $c = (D - L)^{-1}b$. Scrisă pe componente, metoda are forma

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)} \right)$$

- metoda SOR (Successive OverRelaxation). În acest caz, $M = \frac{D}{\omega} - L$. Se obține

$$T = (D - \omega L)^{-1}((1 - \omega)D + \omega U),$$

$$c = \omega(D - \omega L)^{-1}b.$$

Pe componente,

$$x_i^{(k+1)} = (1 - \omega)x_i^{(k)} + \frac{\omega}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)} \right).$$

Valoarea optimă a lui ω , valabilă doar pentru anumite tipuri de matrice (tridiagonale, tridiagonal pe blocuri, ordonate consistent, etc.) este

$$\omega_O = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho^2}}, \quad (6)$$

unde ρ este raza spectrală a matricei metodei lui Jacobi.

2 Considerații de implementare

Dacă putem descompune A sub forma $A = M - N$, unde M este inversabilă, iterația (5) se scrie sub forma

$$x^{(k+1)} = M^{-1} (Nx^{(k)} + b), \quad k \in \mathbb{N}.$$

Folosind operatorul `\` din MATLAB putem scrie iterația sub forma

$$\mathbf{x}c = \mathbf{M} \backslash (\mathbf{N} * \mathbf{x}p + \mathbf{N})$$

unde xp este aproximația precedentă, iar xc aproximația curentă.

Dacă ε_a este eroarea absolută, iar ε_r eroarea relativă, criteriul de oprire se poate scrie sub forma (criteriu mixt)

$$\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \leq \frac{1 - \|T\|}{\|T\|} \varepsilon_a + \varepsilon_r.$$

Pentru efectivitatea criteriului, cei doi termeni $\frac{1 - \|T\|}{\|T\|} \varepsilon_a$ și ε_r trebuie să aibă același ordin de mărime. La implementarea criteriului de oprire pute lua în considerare și reziduul

$$r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$$

și norma sa $\|r^{(k)}\|$. Alegerea unui criteriu de oprire eneral este o problemă dificilă.

Metodele iterative dau rezultate bune dacă sunt aplicate sistemelor mari cu matrice rară sau structurată.

3 Probleme

Problema 1 *Implementați metoda lui Jacobi în MATLAB.*

Problema 2 *Implementați metoda SOR în MATLAB. Găsiți ω optim utilizând (6). Atenție: aceasta nu este o metodă practică pentru calculul lui ω_o ; ea are numai scop didactic.*

Problema 3 *Rezolvați sistemele:*

$$\begin{bmatrix} 5 & -1 & 0 & 0 & \dots & & 0 \\ -1 & 5 & -1 & 0 & \dots & & 0 \\ 0 & -1 & 5 & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -\ddots & 0 & \vdots \\ \vdots & & \ddots & -1 & 5 & -1 & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & -1 & 5 & -1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & -1 & 5 \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \\ 3 \\ \vdots \\ 3 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 5 & -1 & 0 & -1 & \dots & & \dots & 0 \\ -1 & 5 & -1 & 0 & -1 & & & \vdots \\ 0 & -1 & 5 & -1 & \ddots & \ddots & & \vdots \\ -1 & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & -1 & \ddots & -1 & 5 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & \dots & \ddots & 0 & -1 & 5 & -1 & 0 \\ 0 & \dots & & -1 & 0 & -1 & 5 & -1 \\ 0 & \dots & & & -1 & 0 & -1 & 5 \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \\ 2 \\ 1 \\ \vdots \\ 2 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

cu toate metodele implementate.

Problema 4 *Generați sisteme cu matrice diagonal dominante aleatoare ce au soluția $[1, \dots, n]^T$ și rezolvați-le cu metodele Jacobi, Gauss-Seidel și SOR.*

4 Probleme suplimentare

Problema 5 *Testați rutinele implementate pentru matrice rare de diverse dimensiuni și comparați timpii de execuție cu cei necesari pentru matrice dense.*

Problema 6 *Pentru rutinele implementate generați curbe de convergență, adică curbe semilogaritmice care au pe abscisă numărul pasului curent, iar pe ordonată logaritmul normei reziduiului. (folosiți funcția MATLAB `semilogy`).*

Interpolare Lagrange

Radu Trîmbițaș

27 martie 2021

1 Forma clasică

Fie $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$, $x_i \in [a, b]$, $i = 0, \dots, m$. Dacă $x_i \neq x_j$, pentru $i \neq j$, atunci există un polinom unic de gradul m (numit polinomul de interpolare Lagrange), astfel încât:

$$(L_m f)(x_i) = f(x_i), i = 0, \dots, m.$$

Formula de interpolare Lagrange este

$$f = L_m f + R_m f,$$

unde L_m este polinomul de interpolare Lagrange:

$$(L_m f)(x) = \sum_{k=0}^m \ell_k(x) f(x_k), \quad (1)$$

ℓ_k sunt polinoamele fundamentale de interpolare Lagrange

$$\ell_k(x) = \frac{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^m (x - x_j)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^m (x_k - x_j)}, \quad (2)$$

iar R_m este termenul rest:

$$(R_m f)(x) = \frac{(x - x_0) \dots (x - x_m)}{(m+1)!} f^{(m+1)}(x). \quad (3)$$

Dacă valorile funcției sunt tabelate, evaluarea lui ℓ_k necesită $2(n-1)$ înmulțiri, o împărțire și $2n$ scăderi. Întreaga evaluare necesită $2n(n+1)$ * / și $n(2n+3)$ +| -.

2 Algoritmul lui Aitken

Uneori gradul este necunoscut sau precizia dorită poate fi atinsă utilizând un număr mai mic de noduri. Să introducem notațiile:

$$\begin{aligned}(L_{m-1}f)_{1,m}(x) &= \sum_{k=1}^m \ell_k(x)f(x_k), \\ (L_{m-1}f)_{0,m-1}(x) &= \sum_{k=0}^{m-1} \ell_k(x)f(x_k), \\ (L_m f)_{0,m}(x) &= \sum_{k=0}^m \ell_k(x)f(x_k).\end{aligned}\tag{4}$$

Algoritmul lui Aitken se bazează pe relația

$$(L_m f)_{0,m}(x) = \frac{\begin{vmatrix} (L_{m-1}f)_{1,m}(x) & x_0 - x \\ (L_{m-1}f)_{0,m-1}(x) & x_m - x \end{vmatrix}}{x_m - x_0}.$$

Metoda generează tabela următoare:

$$\begin{array}{cccccc} x_0 & f_{0,0} & & & & \\ x_1 & f_{1,0} & f_{1,1} & & & \\ x_2 & f_{2,0} & f_{2,1} & f_{2,2} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ x_i & f_{i,0} & f_{i,1} & f_{i,2} & \cdots & f_{i,i} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots \\ x_n & f_{n,0} & f_{n,1} & f_{n,2} & \cdots & f_{n,i} & \cdots & f_{n,n} \end{array}$$

unde $f_{i,0} = f(x_i)$, $i = 0, \dots, m$, și

$$f_{i,j+1} = \frac{1}{x_i - x_j} \begin{vmatrix} f_{j,j} & x_j - x \\ f_{i,j} & x_i - x \end{vmatrix}.\tag{5}$$

Se verifică ușor că $(L_i f)(x) = f_{i+1,i+1}$, $i = 0, \dots, n-1$, datorită ecuației (??). Dacă interpolarea Lagrange converge, atunci $(f_{i,i})_{i \in \mathbb{N}}$ converge către $f(x)$ și $|f_{i,i} - f_{i-1,i-1}| \rightarrow 0$ când $i \rightarrow \infty$, deci relația $|f_{i,i} - f_{i-1,i-1}| \leq \varepsilon$ ar putea fi utilizată drept criteriu de oprire.

Algoritmul poate fi accelerat dacă sortăm nodurile crescător după distanța lor la x , i.e. $|x_i - x| \leq |x_j - x|$, dacă $i < j$.

Intrare: $m \in \mathbb{N}$, x , x_i , $f_i \in \mathbb{R}$, $i = 0, \dots, m$, $\varepsilon > 0$.

Ieșire: $f_{i,i}$.

P1. Sortează x_i crescător după $a_i = |x - x_i|$.

P2. For $i = 0, \dots, m$ set $f_{i,1} := f(x_i)$.

P3. For $i = 1, \dots, m$ do

P3.1. For $j = 0, \dots, i - 1$ do
 $y_{i,j} := x_i - x_j$;
 $f_{i,j+1} := ((x - x_i) * f_{jj} - (x - x_j) * f_{ij}) / y_{ij}$;
P3.2. If $|f_{i,i} - f_{i-1,i-1}| \leq \varepsilon$ go to P4.
P4. Extrage $f_{i,i}$.

3 Interpolare Lagrange baricentrică

Forma clasică a interpolării Lagrange are următoarele dezavantaje:

1. fiecare evaluare a lui $p(x)$ necesită $\Theta(m^2)$ adunări și înmulțiri;
2. adăugarea unei noi perechi de date (x_{m+1}, f_{m+1}) necesită reluarea tuturor calculelor.
3. procesul de calcul este numeric instabil.

Metoda lui Newton, odată ce s-a generat tabele de diferențe divizate, necesită un timp $\Theta(m)$, dar este instabilă.

3.1 O formulă Lagrange îmbunătățită

Notăm cu $f_i = f(x_i)$. Vom rescrie formulele (1)+(2) astfel ca $(L_m f)(x)$ să poată fi evaluat și actualizat cu $O(m)$ operații. Introducând

$$\ell(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_m) \quad (6)$$

ℓ_j se poate scrie ca $\ell_j(x) = \ell(x)/(x - x_j)$. Definind ponderile baricentrice prin

$$w_j = \frac{1}{\prod_{k \neq j} (x_j - x_k)}, \quad j = 0, \dots, m, \quad (7)$$

adică, $w_j = 1/\ell'(x_j)$, putem scrie ℓ_j sub forma

$$\ell_j(x) = \ell(x) \frac{w_j}{x - x_j}.$$

Acum PIL se scrie

$$(L_m f)(x) = \ell(x) \sum_{j=0}^m \frac{w_j}{x - x_j} f_j. \quad (8)$$

Avantajul este că putem calcula interpolantul Lagrange cu o formulă ce necesită $O(m^2)$ flops pentru calculul unor cantități independente de x , numerele w_j , urmate de $O(m)$ flops pentru evaluarea lui p , odată ce aceste numere sunt cunoscute.

Din (8) rezultă că actualizarea polinomului de interpolare la inserția unui nod nou necesită următoarele calcule:

- se împarte fiecare w_j , $j = 0..m$, prin $x_j - x_{m+1}$ (un flop pentru fiecare punct), cu un cost de $m + 1$ flops;
- se calculează w_{m+1} cu formula (7) cu alte $m + 1$ flops.

3.2 Metoda baricentrică

Interpolând funcția constantă 1 obținem

$$1 = \sum_{j=0}^m \ell_j(x) = \ell(x) \sum_{j=0}^m \frac{w_j}{x - x_j}. \quad (9)$$

Împărțind (8) cu expresia de mai sus și simplificând cu $\ell(x)$, obținem

$$p(x) = \frac{\sum_{j=0}^m \frac{w_j}{x - x_j} f_j}{\sum_{j=0}^m \frac{w_j}{x - x_j}}, \quad (10)$$

numită *formula baricentrică*.

La fel ca în (8), în (10) se poate adăuga o nouă pereche de date (x_{m+1}, f_{m+1}) și actualiza w_j în $O(m)$ flops.

3.3 Distribuții remarcabile

În cazul unor noduri particulare se pot da formule explicite pentru ponderile baricentrice w_j . Pentru noduri echidistante în intervalul $[-1, 1]$, la distanța $h = 2/m$, se obține $w_j = (-1)^m \binom{m}{j} / (h^m m!)$, care după anularea (simplificarea) factorilor independenți de j ne dă

$$w_j = (-1)^j \binom{m}{j}. \quad (11)$$

Același rezultat se obține și pentru un interval arbitrar $[a, b]$, deoarece formula originală pentru w_j se înmulțește cu $2^m(b-a)^{-m}$, dar acest factor poate fi înlăturat prin simplificare.

Familia de *puncte Cebîșev* se poate obține proiectând puncte egal spațiate pe cercul unitate pe intervalul $[-1, 1]$. Pornind de la formula

$$w_j = \frac{1}{\ell'(x_j)}, \quad (12)$$

se pot obține formule explicite pentru ponderile w_j .

Punctele Cebîșev de speța I sunt date de

$$x_j = \cos \frac{(2j+1)\pi}{2m+2}, \quad j = 0, \dots, m.$$

Simplificând factorii independenți de j se obține

$$w_j = (-1)^j \sin \frac{(2j+1)\pi}{2m+2}. \quad (13)$$

Punctele Cebîșev de speța II sunt date de

$$x_j = \cos \frac{j\pi}{m}, \quad j = 0, \dots, m,$$

iar ponderile corespunzătoare sunt

$$w_j = (-1)^j \delta_j, \quad \delta_j = \begin{cases} 1/2, & j = 0 \text{ sau } j = m, \\ 1, & \text{altfel.} \end{cases}$$

Dăm codul MATLAB pentru interpolarea Lagrange baricentrică.

Funcția `barycentricInterpolation` calculează valorile polinomului de interpolare Lagrange folosind metoda baricentrică.

```
function ff=barycentricInterpolation(x,y,xx,c)
%BARYCENTRICINTERPOLATION - barycentric Lagrange interpolation
%call ff=barycentricInterpolation(x,y,xx,c)
%x - nodes
%y - function values
%xx - interpolation points
%c - barycentric weights
%ff - values of interpolation polynomial

n=length(x)-1;
numer = zeros(size(xx));
denom = zeros(size(xx));
exact = zeros(size(xx)); %test if xx=nodes
for j=1:n+1
    xdiff = xx-x(j);
    temp = c(j)./xdiff;
    numer = numer+temp*y(j);
    denom = denom+temp;
    exact(xdiff==0) = j;
end
ff = numer ./ denom;
jj = find(exact);
ff(jj) = y(exact(jj));
```

Funcția `barycentricweights` calculează ponderile baricentrice.

```
function c = barycentricweights( x )
%BARYCENTRICWEIGHTS - compute barycentric weights(coefficient)
%call c = barycentricweights( x )
%x - nodes
%c - weights

n=length(x)-1;
c=ones(1,n+1);
```

```

for j=1:n+1
    c(j)=prod(x(j)-x([1:j-1,j+1:n+1]));
end
c=1./c;
end

```

În cazul nodurilor Cebîșev de speța a doua sursa MATLAB este

```

function ff=ChebLagrange(y,xx,a,b)
%CHEBLAGRANGE - Lagrange interpolation for Chebyshev #2 points- barycentric
%call ff=ChebLagrange(y,xx,a,b)
%y - function values;
%xx - evaluation points
%a,b - interval
%ff - values of Lagrange interpolation polynomial

n = length(y)-1;
if nargin==2
    a=-1; b=1;
end
c = [1/2; ones(n-1,1); 1/2].*(-1).^((0:n)');
x = sort(cos((0:n)'*pi/n))*(b-a)/2+(a+b)/2;
ff=barycentricInterpolation(x,y,xx,c);
end

```

Probleme

1. Implementați o rutină pentru calculul valorilor polinomului de interpolare Lagrange când se dau punctele, nodurile și valorile funcției în noduri.
2. Reprezentați grafic polinoamele fundamentale când se dau gradul și nodurile.
3. Reprezentați pe același grafic f și $L_m f$.
4. Dându-se x , f , m și nodurile, aproximați $f(x)$ utilizând interpolarea Lagrange.
5. Implementați metoda baricentrică.

Probleme practice

1. Datele de mai jos dau populația SUA în perioada 1900 – 2000 (în milioane de locuitori)

t	y
1900	75.995
1910	91.972
1920	105.711
1930	123.203
1940	131.669
1950	150.697
1960	179.323
1970	203.212
1980	226.505
1990	249.633
2000	281.422
2010	308.786

Approximați populația din 1975 și 2018.

2. Fie

$$f(x) = e^{x^2-1}.$$

Aproximați $f(1.25)$ utilizând valorile lui f în 1, 1.1, 1.2, 1.3 și 1.4 și dați o delimitare a erorii.

3. Aproximați $\sqrt{115}$ cu 3 zecimale exacte prin interpolare Lagrange.
4. Dați contraexemple pentru convergența interpolării Lagrange și studiați-le grafic:

- (a) contraexemplul lui Runge $f : [-5, 5] \rightarrow \mathbb{R}$, $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$;
- (b) contraexemplul lui Bernstein $g : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$, $g(x) = |x|$;

ambele cu noduri echidistante și noduri Cebîșev de speța a doua.

5. Aproximați $\sin 5^\circ$ și $\cos 5^\circ$ folosind interpolarea Lagrange și tabela de valori

x	0	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{2}$
$\sin x$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	1
$\cos x$	1	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{1}{2}$	0

Probleme suplimentare

1. Se consideră funcția cu valori complexe $f : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{C}$, data de $f(x) = (3 + \sin 10\pi x + \sin 61e^{0.8 \sin \pi x + 0.7}) e^{i\pi x}$. Să se reprezinte grafic valorile polinomului său de interpolare Lagrange pentru 671 de noduri Cebîșev de speța a doua în cel puțin 10000 de puncte din $[-1, 1]$. (Indicație: `plot(z)` pentru z complex este echivalent cu `plot(real(z), imag(z))`.)

Metode de interpolare bazate pe diferențe divizate

Radu Trîmbițaș

April 4, 2021

1 Forma Newton a polinomului de interpolare Lagrange

Algoritmul nostru se bazează pe forma Newton a polinomului de interpolare Lagrange:

$$(N_m f)(x) = f[x_0] + \sum_{k=1}^m f[x_0, \dots, x_k] \prod_{i=0}^{k-1} (x - x_i), \quad (1)$$

și formula iterativă:

$$\begin{aligned} (N_k f)(x) &= (N_{k-1} f)(x) + (x - x_0) \dots (x - x_{k-1}) f[x_0, \dots, x_k], \quad k = 1, \dots, m, \\ (N_0 f)(x) &= f(x_0). \end{aligned}$$

Notăția $f[x_0, \dots, x_k]$ înseamnă diferența divizată de ordinul k a funcției f cu nodurile x_0, \dots, x_k .

Calculul diferențelor divizate se poate face în formă tabelară cu algoritmul:

Intrare: $x_0, x_1, \dots, x_m, f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_m)$, ca primă coloană $Q_{0,0}, Q_{1,0}, \dots, Q_{n,0}$ a tabelului Q .

Ieșire: numerele $Q_{0,0}, Q_{1,1}, \dots, Q_{n,n}$, unde $Q_{i,i} = f[x_0, \dots, x_i]$.

P1. for $i = 1, 2, \dots, n$ do
 for $j = 1, 2, \dots, i$ do

$$Q_{i,j} := \frac{Q_{i,j-1} - Q_{i-1,j-1}}{x_i - x_{i-j}}, \quad (Q_{i,j} = f[x_{i-j}, \dots, x_i].)$$

P2. returnează $Q_{0,0}, Q_{1,1}, \dots, Q_{n,n}$.

Exemplul 1. Fie funcția dată mai jos (tabela 1); dorim să aproximăm $f(1.5)$ utilizând polinomul de interpolare Newton. Diferențele divizate apar pe prima linie a tabelului. Polinomul Newton corespunzător este

$$\begin{aligned} (N_4 f)(x) &= 0.7651977 - 0.4837057(x - 1.0) - 0.1087339(x - 1.0)(x - 1.3) + \\ &\quad 0.0658784(x - 1.0)(x - 1.3)(x - 1.6) + \\ &\quad 0.0018251(x - 1.0)(x - 1.3)(x - 1.6)(x - 1.9). \end{aligned}$$

x_i	$f(x_i)$	\mathcal{D}^1	\mathcal{D}^2	\mathcal{D}^3	\mathcal{D}^4
1.0	0.7651977	-0.4837057	-0.1087339	0.0658784	0.0018251
1.3	0.6200860	-0.5489460	-0.0494433	0.0680685	0.0000000
1.6	0.4554022	-0.5786120	0.0118183	0.0000000	0.0000000
1.9	0.2818186	-0.5715210	0.0000000	0.0000000	0.0000000
2.2	0.1103623	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000

Table 1: Date pentru exemplul 1

Se verifică ușor că $(N_4 f)(1.5) = 0.5118200$.

Într-o implementare practică a algoritmului este convenabil să se sorteze în prealabil nodurile.

Intrare: $x_0, x_1, \dots, x_m, f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_m), x$.

Ieșire: Valoarea P_i a polinomului de interpolare Newton.

P1. Sortează x_i crescător după $a_i = |x_i - x|$.

P2. $D_{0,0} := f(x_i); P_0 := D_{0,0}; S_1 := 1;$

P3. for $i = 1, \dots, m$ do

P3.1. $D_{i,1} := f(x_i);$

P3.2. for $j = 0, \dots, i - 1$ do $y_{i,j} := x_i - x_j$

P3.3. for $j = 1, \dots, i$ do

$$D_{i,j} := \frac{D_{i,j-1} - D_{i-1,j-1}}{y_{i,i-j+1}}.$$

P3.4. $S_i := S_{i-1} * a_{i-1}; P_i := P_{i-1} + S_i * D_{i,1};$

P3.5. if $|P_i - P_{i-1}| < \varepsilon$ go to P4.

P4. returnează P_i .

Se poate obține o implementare satisfăcătoare, dacă se renunță la sortare și la if-ul final, iterând până la sfârșit după i și j .

2 Interpolare Hermite

Fie $x_k \in [a, b]$, $k = 0, \dots, m$, $x_i \neq x_j$ pentru $i \neq j$, $r_k \in \mathbb{N}$, $k = 0, \dots, m$, și $f : [a, b] \rightarrow R$ astfel încât $\exists f^{(j)}(x_k)$, $k = 0, \dots, m$, $j = 0, \dots, r_k$. Problema de interpolare Hermite cere determinarea unui polinom P de grad minim, care verifică

$$P^{(j)}(x_k) = f^{(j)}(x_k), \quad k = 0, \dots, m, j = 0, \dots, r_k.$$

Fie $n + 1 = m + r_0 + \dots + r_m = (r_0 + 1) + \dots + (r_m + 1)$. Polinomul de interpolare Hermite are expresia:

$$(H_n f)(x) = \sum_{k=0}^m \sum_{j=0}^{r_k} h_{kj}(x) f^{(j)}(x_k), \quad (2)$$

unde h_{kj} sunt polinoamele fundamentale Hermite date de

$$h_{kj}(x) = \frac{(x - x_k)^j}{j!} u_k(x) \sum_{\nu=0}^{r_k-j} \frac{(x - x_k)^\nu}{\nu!} \left[\frac{1}{u_k(x)} \right]_{x=x_k}^{(\nu)}, \quad (3)$$

și

$$u(x) = \prod_{k=0}^m (x - x_k)^{r_k},$$

$$u_k(x) = \frac{u(x)}{(x - x_k)^{r_k}}.$$

Expresia restului este:

$$(R_n f)(x) = \frac{u(x)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi), \quad \xi \in (\alpha, \beta)$$

unde $\alpha = \min(x, x_0, \dots, x_m)$, $\beta = \max(x, x_0, \dots, x_m)$.

Vom da o metodă de calcul a polinomului de interpolare Hermite cu noduri duble dedusă din polinomul de interpolare Newton. Dându-se x_i și $f(x_i)$, $f'(x_i)$, $i = 0, \dots, m$, definim secvența $z_0, z_1, \dots, z_{2m+1}$

$$z_{2i} = z_{2i+1} = x_i, \quad i = 0, \dots, m.$$

Construim acum tabela de diferențe divizate a lui f pentru nodurile z_i , $i = 0, \dots, 2m+1$. Deoarece $z_{2i} = z_{2i+1} = x_i$ pentru $i = 0, \dots, m$, $f[z_{2i}, z_{2i+1}]$ este o diferență divizată cu noduri duble și este egală cu $f'(x_i)$, deci în locul diferențelor divizate de ordinul I $f[z_0, z_1]$, $f[z_2, z_3]$, ..., $f[z_{2m}, z_{2m+1}]$ vom utiliza derivatele $f'(x_0)$, $f'(x_1)$, ..., $f'(x_m)$. Celelalte diferențe divizate se obțin în mod obișnuit, așa cum arată tabela de mai jos. Acest algoritm se poate extinde și la alte tipuri de interpolare Hermite. Se pare că metoda este datorată lui Powell.

z	\mathcal{D}^0	\mathcal{D}^1	\mathcal{D}^2
$z_0 = x_0$	$f[z_0] = f(x_0)$	$f[z_0, z_1] = f'(x_0)$	$f[z_0, z_1, z_2]$
$z_1 = x_0$	$f[z_1] = f(x_0)$	$f[z_1, z_2]$	$f[z_1, z_2, z_3]$
$z_2 = x_1$	$f[z_2] = f(x_1)$	$f[z_2, z_3] = f'(x_1)$	$f[z_2, z_3, z_4]$
$z_3 = x_1$	$f[z_3] = f(x_1)$	$f[z_3, z_4]$	$f[z_3, z_4, z_5]$
$z_4 = x_2$	$f[z_4] = f(x_2)$	$f[z_4, z_5] = f'(x_2)$	
$z_5 = x_2$	$f[z_5] = f(x_2)$		

Algoritm de interpolare Hermite. Calculează coeficienții polinomului de interpolare Hermite (diferențele divizate) a lui f cu nodurile duble $x_k \in [a, b]$, $k = 0, \dots, m$.

Intrare. $x_0, \dots, x_m, f(x_0), \dots, f(x_m), f'(x_0), \dots, f'(x_m)$.

Ieșire. Numerele $Q_{0,0}$, $Q_{1,1}$, ..., $Q_{2m+1,2m+1}$ (diferențele divizate de pe prima linie a tablei), unde

$$(H_{2m+1}f)(x) = Q_{0,0} + Q_{1,1}(x - x_0) + Q_{2,2}(x - x_0)^2 + Q_{3,3}(x - x_0)^2(x - x_1) + Q_{4,4}(x - x_0)^2(x - x_1)^2 + \dots + Q_{2m+1,2m+1}(x - x_0)^2(x - x_1)^2 \dots (x - x_{m-1})^2(x - x_m).$$

P1. for $i = 0, \dots, m$ do pașii P2 și P3.
P2. $z_{2i} := x_i; z_{2i+1} := x_i; Q_{2i,0} := f(x_i); Q_{2i+1,0} := f(x_i); Q_{2i+1,1} := f'(x_i);$
P3. if $i \neq 0$ then $Q_{2i,1} = \frac{Q_{2i,0} - Q_{2i-1,0}}{z_{2i} - z_{2i-1}}.$
P4. for $i = 2, 3, \dots, 2m+1$ do
for $j=2,3,\dots, i$ do $Q_{i,j} = \frac{Q_{i,j-1} - Q_{i-1,j-1}}{z_i - z_{i-j}}.$
P5. Extrage $Q_{0,0}, Q_{1,1}, \dots, Q_{2m+1,2m+1}$. Stop.

Exemplu. Fie datele de intrare

k	x	$f(x)$	$f'(x)$
0	1.3	0.6200860	-0.5220232
1	1.6	0.4554022	-0.5698959
2	1.9	0.2818186	-0.5811571

Utilizând diferențele divizate se obține (datele de intrare sunt subliniate):

$$\begin{aligned}
H_5(1.5) &= 0.6200860 + (1.5 - 1.3)(-0.5220232) + (1.5 - 1.3)^2(-0.897427) + \\
&\quad (1.5 - 1.3)^2(1.5 - 1.6)(0.0663657) + \\
&\quad (1.5 - 1.3)^2(1.5 - 1.6)^2(1.5 - 1.9)(-0.0027738) \\
&= 0.5118277
\end{aligned}$$

1.3	<u>0.6200860</u>	<u>-0.5220232</u>	-0.0897427	0.0663657	0.0026663	-0.0027738
1.3	<u>0.6200860</u>	-0.5489460	-0.0698330	0.0679655	0.0010020	
1.6	<u>0.4554022</u>	<u>-0.5698959</u>	-0.0290937	0.0685667		
1.6	<u>0.4554022</u>	-0.5786120	-0.0084837			
1.9	<u>0.2818186</u>	<u>-0.5811571</u>				
1.9	<u>0.2818186</u>					

3 Probleme

1. Implementați o rutină pentru calculul valorilor polinomului de interpolare Hermite cu noduri duble, dându-se punctele în care se face evaluarea, nodurile, valorile funcției și ale derivatei în noduri.
2. Reprezentați pe același grafic f și polinomul său de interpolare Hermite.
3. Scrieți o rutină care reprezintă grafic o cubică parametrică Hermite (o curbă care trece prin două puncte date și are în acele puncte tangente date).

4 Probleme practice

1. Pentru $f(x) = e^x$ și nodurile de interpolare 0, 1, 2, aproximați $f(0.25)$ prin interpolare Hermite și comparați rezultatul cu cel obținut prin interpolare Lagrange. Dați o delimitare a erorii. Comparați cu rezultatul furnizat de software-ul utilizat.
2. Utilizați valorile date mai jos pentru a aproxima $\sin 0.34$ utilizând interpolarea Hermite.

x	$\sin x$	$(\sin x)' = \cos x$
0.30	0.29552	0.95534
0.32	0.31457	0.94924
0.35	0.34290	0.93937

Dați o delimitare a erorii și comparați-o cu eroarea exactă. Adăugați datele pentru nodul $x = 0.33$ și refaceți calculele.

3. Un automobil care se deplasează pe un drum drept este cronometrat în mai multe puncte. Datele de observație se dau în tabela de mai jos. Utilizați interpolarea Hermite pentru a prevedea poziția și viteza automobilului la momentul $t = 10$.

Timpul	0	3	5	8	13
Distanța	0	225	383	623	993
Viteza	75	77	80	74	72

5 Probleme suplimentare

1. Implementați interpolarea Hermite pentru noduri de multiplicitate arbitrară. Intrare: nodurile x_k , multiplicitățile r_k , valorile $f^{(j)}(x_k)$, $k = 0, \dots, m$, $j = 0, \dots, r_k$, punctul (sau punctele) t în care se face evaluarea. Ieșire: valorile polinomului de interpolare în punctul (sau punctele) t . (Indicație: folosiți pentru valorile funcției și derivatelor un tablou de celule.)

Interpolare spline

Radu T. Trîmbițaș

12 aprilie 2021

Implementați următoarele tipuri de spline cubice: spline complete, spline care reproduc derivatele de ordinul al doilea, spline naturale și spline deBoor.

Pentru algoritmi a se vedea notele de curs sau slide-urile.

Probleme

1. Pentru fiecare tip de spline scrieți o funcție care calculează coeficienții spline-ului, dacă se dau nodurile și valorile funcției.
2. Evaluați spline-ul pe o mulțime de puncte, dacă se dau nodurile, punctele și coeficienții.
3. Desenați o curbă spline cubică parametrică ce trece printr-o mulțime de puncte date.

Probleme suplimentare

1. Scrieți o funcție MATLAB pentru calculul coeficienților unui spline periodic de clasă $C^2[a, b]$. Aceasta înseamnă că datele trebuie să verifice $f_n = f_1$ și că interpolantul rezultat trebuie să fie periodic, de perioadă $x_n - x_1$. Condițiile de periodicitate de la capete se pot impune mai ușor considerând două puncte suplimentare $x_0 = x_1 - \Delta x_{n-1}$ și $x_{n+1} = x_n + \Delta x_1$, în care funcția să ia valorile $f_0 = f_{n-1}$ și respectiv $f_{n+1} = f_2$.
2. Scrieți o funcție MATLAB pentru calculul coeficienților unui spline Hermite de clasă $C^1[a, b]$. Interpolantul va trebui să verifice condițiile $s_3(f; x_i) = f(x_i)$ și $s'_3(f; x_i) = f'(x_i)$, $i = 1, \dots, n$.

Aproximare prin metoda celor mai mici pătrate

Radu T. Trîmbițaș

25 mai 2020

Fie $f \in L_w^2[a, b]$ și $\Phi \leq L_w^2[a, b]$ de dimensiune $n + 1$. Dorim să găsim o aproximantă $\varphi^* \in \Phi$ astfel încât $\|\varphi^* - f\|^2 \leq \|\varphi - f\|^2, \forall \varphi \in \Phi$.

Scriem

$$\varphi^*(x) = a_0\varphi_0(x) + \dots + a_n\varphi_n(x), \quad (1)$$

unde $\{\varphi_k | k = 0, \dots, n\}$ este o bază a lui Φ .

Coeficienții sunt soluțiile ecuațiilor normale

$$a_0(\varphi_0, \varphi_k) + a_1(\varphi_1, \varphi_k) + \dots + a_n(\varphi_n, \varphi_k) = (f, \varphi_k), \quad k = 0, \dots, n. \quad (2)$$

Dacă sistemul $\{\varphi_k | k = 0, \dots, n\}$ este ortogonal, coeficienții se pot obține cu ajutorul formulelor

$$a_k = \frac{(f, \varphi_k)}{(\varphi_k, \varphi_k)}, \quad k = 0, \dots, n. \quad (3)$$

Aproximanta poate fi continuă sau discretă, în funcție de măsura aleasă în definiția produsului scalar. În cazul continuu produsul scalar are forma

$$(g, h) = \int_a^b w(x)g(x)h(x)dx,$$

iar în cazul discret

$$(g, h) = \sum_{k=0}^N w_k g(x_k) h(x_k).$$

Să considerăm relația de recurență pentru polinoamele ortogonale monice

$$\begin{aligned}\pi_{k+1}(x) &= (x - \alpha_k)\pi_k(x) - \beta_k\pi_{k-1}(x), k = 0, 1, 2, \dots \\ \pi_0(x) &= 1, \pi_{-1}(x) = 0,\end{aligned}$$

unde

$$\beta_0 = \int_a^b w(x)f(x)dx = \mu_0.$$

Coefficienții din relația de recurență (2) au expresia

$$\alpha_k = \frac{(x\pi_k, \pi_k)}{(\pi_k, \pi_k)}, \beta_k = \frac{(\pi_k, \pi_k)}{(\pi_{k-1}, \pi_{k-1})}.$$

Reamintim câteva dintre polinoamele ortogonale clasice și coeficienții din relațiile lor de recurență:

Polinoamele	Notăția	Pondere	interval	α_k	β_k
Legendre	$P_n(l_n)$	1	$[-1,1]$	0	$2 \ (k=0)$ $(4-k^2)^{-1} \ (k>0)$
Cebîșev #1	T_n	$(1-t^2)^{-\frac{1}{2}}$	$[-1,1]$	0	$\pi \ (k=0)$ $\frac{1}{2} \ (k=1)$ $\frac{1}{4} \ (k>0)$
Cebîșev #2	$U_n(Q_n)$	$(1-t^2)^{\frac{1}{2}}$	$[-1,1]$	0	$\frac{1}{2}\pi \ (k=0)$ $\frac{1}{4} \ (k>0)$
Jacobi	$P_n^{(\alpha,\beta)}$	$(1-t)^\alpha(1+t)^\beta$ $\alpha>-1, \beta>-1$	$[-1,1]$		
Laguerre	$L_n^{(\alpha)}$	$t^\alpha e^{-t} \ \alpha>-1$	$[0,\infty)$	$2k+\alpha+1$	$\Gamma(1+\alpha) \ (k=0)$ $k(k+\alpha) \ (k>0)$
Hermite	H_n	e^{-t^2}	\mathbb{R}	0	$\sqrt{\pi} \ (k=0)$ $\frac{1}{2}k \ (k>0)$

Tabela 1: Polinoame ortogonale

Observația 1 Pentru polinoamele Jacobi avem

$$\alpha_k = \frac{\beta^2 - \alpha^2}{(2k + \alpha + \beta)(2k + \alpha + \beta + 2)}$$

și

$$\beta_0 = 2^{\alpha+\beta+1} B(\alpha+1, \beta+1),$$

$$\beta_k = \frac{4k(k+\alpha)(k+\alpha+\beta)(k+\beta)}{(2k+\alpha+\beta-1)(2k+\alpha+\beta)^2(2k+\alpha+\beta+1)}, \quad k > 0.$$

Probleme propuse.

1. Să se găsească aproximanta discretă prin metoda celor mai mici pătrate pentru ponderea $w(x)=1$ și baza $1, x, x^2, \dots, x^n$.
2. Un asteroid ce orbitează în jurul Soarelui a putut fi observat timp de câteva zile înainte să dispară. Iată 10 observații

$x_{1:5}$	-1.024940	-0.949898	-0.866114	-0.773392	-0.671372
$x_{6:10}$	-0.559524	-0.437067	-0.302909	-0.159493	-0.007464
$y_{1:5}$	-0.389269	-0.322894	-0.265256	-0.216557	-0.177152
$y_{6:10}$	-0.147582	-0.128618	-0.121353	-0.127348	-0.148895

Se dorește calcularea traiectoriei pe baza acestor observații pentru a putea prevedea situația când orbita va fi din nou vizibilă. Se presupune un model elipsoidal pentru orbită

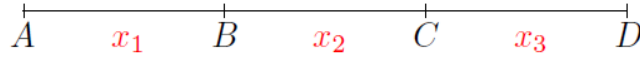
$$x^2 = ay^2 + bxy + cx + dy + e.$$

El ne conduce la un sistem supradeterminat, care trebuie rezolvat în sensul celor mai mici pătrate pentru a determina parametrii a, b, c, d, e . Realizați o estimare a erorii și un test de încredere în model. Faceți același lucru pentru modelul parabolic

$$x^2 = ay + e.$$

Care este mai probabil?

3. La măsurarea unui segment de drum, presupunem că am efectuat 5 măsurători



$$AD = 89m, \quad AC = 67m, \quad BD = 53m, \quad AB = 35m \text{ și } CD = 20m,$$

Să se determine lungimile segmentelor $x_1 = AB$, $x_2 = BC$ și $x_3 = CD$.

4. Datele următoare dau populația SUA (în milioane) determinată la recensăminte de US Census, între anii 1900 și 2010. Dorim să modelăm populația și să o estimăm pentru anii 1975 și 2010.

An	Populația	An	Populația
1900	75.995	1960	179.320
1910	91.972	1970	203.210
1920	105.710	1980	226.510
1930	123.200	1990	249.630
1940	131.670	2000	281.420
1950	150.700	2010	308.790

Modelați populația printr-un model polinomial de gradul 3

$$y = c_0 + c_1t + c_2t^2 + c_3t^3,$$

și printr-un model exponențial

$$y = Ke^{\lambda t}.$$

Probleme suplimentare

1. Să se găsească aproximanta discretă prin metoda celor mai mici pătrate pentru ponderea $w(x) = 1$ și baza formată din polinoamele Cebîșev de speța I. Produsul scalar are forma

$$(g, h) = \sum_{k=1}^{n+1} g(\xi_k)h(\xi_k),$$

unde ξ_k , $k = 1, \dots, n+1$ sunt rădăcinile polinomului Cebîșev de speța I T_{n+1} .

2. Se dă un polinom prin coeficienții săi relativ la o bază ortogonală $\{\pi_j\}$:

$$p(t) = \sum_{i=0}^n c_i \pi_i(t).$$

Să se dea o metodă de evaluare analoagă schemei lui Horner. (*Indicație:* se va folosi relația de recurență și coeficienții ei.)

Integrare numerică

Radu T. Trîmbițaș

25 aprilie 2021

1 Formule repetate

Fie $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ integrabilă pe $[a, b]$, $n \in \mathbb{N}$, $h = (b - a)/n$ și nodurile echidistante $x_k = a + kh$, $k = 0, 1, \dots, n$.

Formula repetată a trapezului:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2n} \left[f(a) + f(b) + 2 \sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) \right] + R_1(f),$$

unde

$$R_1(f) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\xi), \quad \xi \in (a, b).$$

Formula repetată a lui Simpson:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{6m} \left[f(a) + f(b) + 2 \sum_{k=1}^{m-1} f(x_{2k}) + 4 \sum_{k=1}^m f(x_{2k-1}) \right] + R_2(f),$$

unde $n = 2m$; $h = (b - a)/(2m)$; $x_k = a + kh$; $k = 0, 1, \dots, 2m$, iar

$$R_2(f) = -\frac{(b-a)^5}{2880m^4}.$$

Formula dreptunghiurilor:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{n} \sum_{k=1}^n f\left(\frac{x_{k-1} + x_k}{2}\right) + R_1(f)$$

unde

$$R_1(f) = \frac{(b-a)^3}{24n^2} f''(\xi), \quad \xi \in (a, b).$$

2 Cuadraturi adaptive

Fie $\text{met}(a, b, f, n)$ be a composite formula. o formulă repetată oarecare. Ideea este de a împărți $[a, b]$ în subintervale și de a folosi un număr mic de noduri pe subintervalele pe care oscilația lui f este lentă și un număr mai mare de puncte pe subintervalele pe care oscilația lui f este mai rapidă. Algoritmul este de tip divide and conquer:

```
function adaptquad(a,b:real; f:funct; tol:real):real;
  if |met(a,b,f,m)-met(a,b,f,2m)|<tol
    then adaptquad:=met(a,b,f,2*m)
    else adaptquad:=adaptquad(a,(a+b)/2,f,tol)+
      adaptquad((a+b)/2,b,f,tol);
end
```

Cantitatea m este o constantă convenabilă (4 sau 5).

3 Metoda lui Romberg

Se bazează pe metoda trapezelor și pe extrapolarea Richardson. Fie $h_1 = b - a$. Vom utiliza formulele

$$R_{1,1} = \frac{h_1}{2} [f(a) + f(b)] = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)]$$

$$R_{k,1} = \frac{1}{2} \left[R_{k-1,1} + h_{k-1} \sum_{i=1}^{2^{k-2}} f \left(a + \left(i - \frac{1}{2} \right) h_{k-1} \right) \right], \quad k = \overline{2, n}$$

$$R_{k,j} = \frac{4^{j-1} R_{k,j-1} - R_{k-1,j-1}}{4^{j-1} - 1}, \quad k = \overline{2, n}$$

$$h_k = \frac{h_{k-1}}{2} = \frac{b-a}{2^{k-1}}.$$

Exemplu. Aproximați $\int_0^\pi \sin x dx$ prin metoda lui Romberg, $\varepsilon = 10^{-2}$.

Soluție.

$$I = \int_0^\pi \sin x dx = 2$$

$$R_{1,1} = \frac{\pi}{2} (0 + 0) = 0$$

$$R_{2,1} = \frac{1}{2} \left(R_{1,1} + \pi \sin \frac{\pi}{2} \right) = 1.571$$

$$R_{2,2} = 1.571 + (1,571 - 0)/3 = 2.094$$

$$(R_{2,2} - R_{1,1}) > 0.01$$

$$R_{3,1} = \frac{1}{2} \left[R_{2,1} + \frac{\pi}{2} \left(\sin \frac{\pi}{4} + \sin \frac{3\pi}{4} \right) \right] = 1.895$$

$$R_{3,2} = 1,895 + \frac{1.895 - 1.571}{3} = 2.004$$

$$R_{3,3} = 2.004 + (2.004 - 2.094)/15 = 1.999$$

$$|R_{3,3} - R_{2,2}| < 0.1$$

Valoarea exactă a integralei este $I = 2$. Pentru formula trapezelor cu același număr de argumente se obține $I \approx 1,895$,

iar pentru formula repetată a lui Simpson cu 4 noduri, $I \approx 2.005$.

Calculule se pot realiza în mod tabelar.

$$\begin{array}{cccc} R_{1,1} & & & \\ R_{2,1} & R_{2,2} & & \\ R_{3,1} & R_{3,2} & R_{3,3} & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ R_{n,1} & R_{n,2} & R_{n,3} & \dots & R_{n,n} \end{array}$$

Un posibil criteriu de oprire este $|R_{n,n} - R_{n-1,n-1}| < \varepsilon$.

4 Cuadraturi adaptive II

Coloana a doua din metoda lui Romberg corespunde aproximării prin metoda lui Simpson. Notăm

$$S_{k,1} = R_{k,2}.$$

Coloana a treia este deci o combinație a două aproximante de tip Simpson:

$$S_{k,2} = S_{k,1} + \frac{S_{k,1} - S_{k-1,1}}{15} = R_{k,2} + \frac{R_{k,2} - R_{k-1,2}}{15}.$$

Relația

$$S_{k,2} = S_{k,1} + \frac{S_{k,1} - S_{k-1,1}}{15}, \quad (1)$$

va fi folosită la elaborarea unui algoritm de quadratură adaptivă. Fie $c = (a + b)/2$. Formula elementară a lui Simpson este

$$S = \frac{h}{6} (f(a) + 4f(c) + f(b)).$$

Pentru două subintervale se obține

$$S_2 = \frac{h}{12} (f(a) + 4f(d) + 2f(c) + 4f(e) + f(b)),$$

unde $d = (a + c)/2$ și $e = (c + b)/2$. Cantitatea Q se obține aplicând (1) celor două aproximante:

$$Q = S_2 + (S_2 - S)/15.$$

Putem să dam acum un algoritm recursiv pentru aproximarea integralei. Funcția *adquad* evaluează integrandul aplicând regula lui Simpson. Ea apelează recursiv *quadstep* și aplică extrapolarea. Descrierea se dă în algoritmul 1.

Algorithm 1 Cuadratură adaptivă bazată pe metoda lui Simpson și extrapolare

Intrare: funcția f , intervalul $[a, b]$, eroarea ε

Ieșire: Valoarea aproximativă a integralei

```

function adquad( $f, a, b, \varepsilon$ ) : real
   $c := (a + b)/2$ ;
   $fa = f(a)$ ;  $fb := f(b)$ ;  $fc := f(c)$ ;
   $Q := \text{quadstep}(f, a, b, \varepsilon, fa, fc, fb)$ ;
  return  $Q$ ;
function quadstep( $f, a, b, \varepsilon, fa, fc, fb$ ) : real
   $h := b - a$ ;  $c := (a + b)/2$ ;
   $fd := f((a + c)/2)$ ;  $fe := f((c + b)/2)$ ;
   $Q1 := h/6 * (fa + 4 * fc + fb)$ ;
   $Q2 := h/12 * (fa + 4 * fb + 2 * fc + 4 * fe + fb)$ ;
  if  $|Q1 - Q2| < \varepsilon$  then
     $Q := Q2 + (Q2 - Q1)/15$ ;
  else
     $Qa := \text{quadstep}(f, a, c, \varepsilon, fa, fd, fc)$ ;
     $Qb := \text{quadstep}(f, c, b, \varepsilon, fc, fe, fb)$ ;
     $Q := Qa + Qb$ ;
  end if
  return  $Q$ ;

```

5 Probleme

1. Implementați formula repetată a trapezului, dreptunghiului și a lui Simpson.
2. Concepeți o reprezentare grafică intuitivă pentru formula trapezelor și formula repetată a lui Simpson (facultativ).
3. Implementați o metoda de cuadratură adaptivă pentru formula repetată a lui Simpson, una pentru metoda trapezelor și una pentru metoda dreptunghiurilor.
4. Implementați metoda lui Romberg.
5. Implementați `adquad`, algoritmul 1.

6 Probleme practice

1. Generați formule Newton-Cotes închise pentru un număr de noduri dat.
2. Testați rutinele de integrare de la această temă pentru diverse funcții a caror primitivă nu este exprimabilă prin funcții elementare și comparați rezultatele cu cele furnizate de funcțiile MATLAB `quad` și `integral`.

Generarea unor cuadraturi de tip Gauss

Radu T. Trîmbițaș

10 mai 2021

Formula

$$\int_a^b w(x)f(x)dx = \sum_{k=1}^n A_k f(x_k) + R_n(f)$$

se numește de tip Gauss dacă coeficienții și nodurile sunt alese astfel încât gradul de exactitate să fie maxim. Nodurile x_k , $k = 1, \dots, n$ sunt rădăcinile polinomului

$$\pi_n(x) = \prod_{k=1}^n (x - x_k).$$

ortogonal pe $[a, b]$, în raport cu ponderea w .

Să considerăm relația de recurență pentru polinoamele ortogonale monice

$$\begin{aligned} \pi_{k+1}(x) &= (x - \alpha_k)\pi_k(x) - \beta_k\pi_{k-1}(x), & k &= 0, 1, 2, \dots \\ \pi_0(x) &= 1, & \pi_{-1}(x) &= 0. \end{aligned} \quad (1)$$

unde

$$\beta_0 = \int_a^b w(x)f(x)dx = \mu_0. \quad (2)$$

Coeficienții din relația de recurență (1) au expresia

$$\alpha_k = \frac{(x\pi_k, \pi_k)}{(\pi_k, \pi_k)}, \quad \beta_k = \frac{(x\pi_k, \pi_{k-1})}{(\pi_{k-1}, \pi_{k-1})}.$$

Matricea Jacobi de ordinul n a funcției pondere w este o matrice tridia-

gonală simetrică, definită prin

$$J_n(w) = \begin{bmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & & & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \sqrt{\beta_2} & & \\ & \sqrt{\beta_2} & & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \sqrt{\beta_{n-1}} \\ 0 & & & \sqrt{\beta_{n-1}} & \alpha_{n-1} \end{bmatrix}.$$

Nodurile x_k sunt valori proprii ale lui J_n

$$J_n v_k = x_k v_k, \quad v_k^T v_k = 1, \quad k = 1, 2, \dots, n, \quad (3)$$

iar coeficienții A_k se pot exprima cu ajutorul primei componente $v_{k,1}$ a vectorilor proprii corespunzători normalizați:

$$w_k = \beta_0 v_{k,1}^2, \quad k = 1, 2, \dots, n \quad (4)$$

Dacă $f \in C^{2n}[a, b]$, pentru rest avem expresia

$$R_n(f) = \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!} \int_a^b w(x) \pi_n^2(x) dx.$$

Tabela 1 dă câteva dintre polinoamele ortogonale clasice și coeficienții din relațiile lor de recurență.

Cu datele din tabel se formează matricea J și se găsesc x_k și A_k . Polinoamele ortogonale se aleg în funcție de intervalul de definiție și de pondere. De exemplu, pentru $w = 1$ se lucrează cu polinoamele Legendre pe $[-1, 1]$ și se face apoi schimbarea de variabilă pentru a trece la $[a, b]$.

Observația 1 Pentru polinoamele Jacobi avem

$$\alpha_k = \frac{\beta^2 - \alpha^2}{(2k + \alpha + \beta)(2k + \alpha + \beta + 2)}$$

și

$$\beta_0 = 2^{\alpha+\beta+1} B(\alpha + 1, \beta + 1),$$

$$\beta_k = \frac{4k(k + \alpha)(k + \alpha + \beta)(k + \beta)}{(2k + \alpha + \beta - 1)(2k + \alpha + \beta)^2(2k + \alpha + \beta + 1)}, \quad k > 0.$$

Polinoamele	Notăție	Ponderea	interval	α_k	β_k
Legendre	$P_n(l_n)$	1	$[-1,1]$	0	$2 \ (k=0)$ $(4-k^{-2})^{-1} \ (k>0)$
Cebîșev #1	T_n	$(1-t^2)^{-\frac{1}{2}}$	$[-1,1]$	0	$\pi \ (k=0)$ $\frac{1}{2} \ (k=1)$ $\frac{1}{4} \ (k>1)$
Cebîșev #2	$u_n(Q_n)$	$(1-t^2)^{\frac{1}{2}}$	$[-1,1]$	0	$\frac{1}{2}\pi \ (k=0)$ $\frac{1}{4} \ (k>0)$
Jacobi	$P_n^{(\alpha,\beta)}$	$(1-t)^\alpha (1-t)^\beta$ $\alpha > -1, \beta > -1$	$[-1,1]$		
Laguerre	$L_n^{(\alpha)}$	$t^\alpha e^{-t} \ \alpha > -1$	$[0,\infty)$	$2k+\alpha+1$	$\Gamma(1+\alpha) \ (k=0)$ $k(k+\alpha) \ (k>0)$
Hermite	H_n	e^{-t^2}	\mathbb{R}	0	$\sqrt{\pi} \ (k=0)$ $\frac{1}{2}k \ (k>0)$

Tabela 1: Polinoame ortogonale

Probleme.

1. Implementați funcții ce generează formule de cuadratură gaussiene pentru ponderile clasice date în tabela 1.
2. Să se calculeze integralele $\int_{-1}^1 \sin x^2 dx$ și $\int_{-1}^1 \cos x^2 dx$ cu precizia $\varepsilon = 10^{-7}$ folosind o cuadratură gaussiană. Câte noduri sunt necesare?
3. Determinați o formulă de cuadratură de forma

$$\int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \sum_{k=1}^{10} A_k f(x_k) + R(f)$$

care să aibă grad maxim de exactitate. Să se aplice formula pentru a calcula $\int_{-1}^1 \frac{x e^{-x^2}}{\sqrt{1-x^2}} dx$. Verificare.

4. Determinați o formulă de cuadratură de forma

$$\int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} f(x) dx = \sum_{k=1}^{10} A_k f(x_k) + R(f)$$

care să aibă grad maxim de exactitate. Să se aplice formula pentru a calcula $\int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} e^{-x^2} dx$. Cât este eroarea?

5. Calculați

$$\int_0^\infty e^{-x} \sin(x) dx, \quad \int_0^\infty e^{-x} \cos(x) dx,$$

cu 8 zecimale exacte folosind o cuadratură Gauss-Laguerre.

6. Calculați

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-x^2} \sin x dx, \quad \int_{\mathbb{R}} e^{-x^2} \cos x dx$$

utilizând o formulă de cuadratură Gauss-Hermite.

7. Aproximați $\int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\sqrt{\sin x}} dx$ cu 9 zecimale exacte, folosind o cuadratură Gauss-Jacobi.